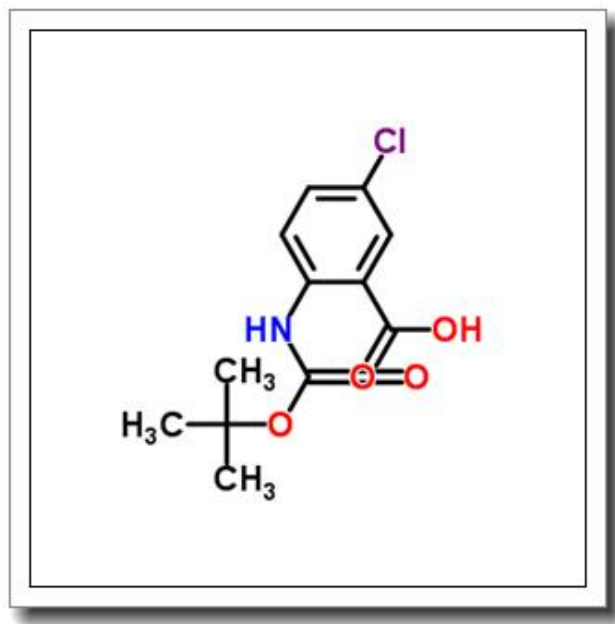


2-叔丁氧基羰氨基-5-氯苯甲酸

5-chloro-2-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]benzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-chloro-2-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]benzoic acid
中文名称	2-叔丁氧基羰氨基-5-氯苯甲酸
CAS 号	253677-29-1
分子式	C ₁₂ H ₁₄ ClN ₁ O ₄
分子量	271.697
纯度	≥96%

产品说明

2-叔丁氧羰氨基-5-氯苯甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 5-氯-2-[(2-甲基丙-2-基)氧羰基氨基]苯甲酸, CAS 登记号 253677-29-1, 是一种白色至类白色结晶粉末。分子式 $C_{12}H_{14}ClNO_4$, 分子量 271.697, 纯度 $\geq 96\%$ 。该化合物属于苯甲酸衍生物, 结构中同时含有羧酸基团、氨基甲酸叔丁酯保护基及氯取代基, 使其兼具亲水性与脂溶性, 在有机溶剂如 DMSO、甲醇中具有良好溶解性。

2. 生物化学功能与重要性

作为重要的有机合成中间体, 其叔丁氧羰基 (Boc) 保护基在肽类合成中能有效保护氨基, 避免副反应发生。氯原子的引入增强了分子电子效应, 使其在金属催化偶联反应中表现出特殊活性。该结构单元广泛用于构建药物分子骨架, 特别是在 β -内酰胺类抗生素和抗肿瘤化合物的合成中具有关键作用。

3. 主要应用领域与具体用途

- (1) 医药领域: 用于卡托普利类降压药及抗凝血剂阿哌沙班的中间体合成
- (2) 材料科学: 作为液晶材料的功能性前体
- (3) 科研用途: 用于研究酶抑制剂与受体的相互作用机制
- (4) 不对称合成: 作为手性诱导剂构建光学活性分子

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20°C 干燥避光环境中保存, 开封后需充惰性气体保护。使用前需恢复至室温并保持环境干燥, 避免与强氧化剂、强酸强碱接触。实验操作应在通风橱中进行, 推荐使用丁腈手套及护目镜等防护装备。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 重金属含量 $< 10\text{ppm}$ 。安全数据表明其急性毒性 (LD_{50} 大鼠经口) $> 2000\text{mg/kg}$, 但仍可能引起眼睛和皮肤刺激。如发生接触, 应

立即用大量清水冲洗至少 15 分钟。废弃物处理需符合当地危险化学品处置法规，建议采用专业焚烧法处理。

（注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件调整。产品规格可能因批次略有差异，请以实际质检报告为准。）